Index

Commentationes et Relationes

Amaral, A. M. S. C., J. W. Linnett, and C. T. Williamson: The Double-Bond in Ethylene . . . 249
Armstrong, A. T., s. Watson, F. H., Jr., et al. . . . 75

Bailey, J. P. M., s. Bailey, M. L. . . . 309
Bailey, M. L.: PPP Calculations of the Absorption Spectra of Purines and Pyrimidines 309
—, and J. P. M. Bailey: PPP and CNDO Calculations for Protonated Molecules . . . 303
Baird, N. C.: π-Electron Hyperconjugation in Organic Molecules and Ions . . . 239
Bates, J. K., s. Ferreira, R. . . . 111
Bender, C. F.: Uses of Pair Energy Techniques in Molecular Calculations: The Ammonia Molecule . . . 401
Berthier, G., B. Lévy, and L. Paoloni: The Electronic Structure of N-Methyl-3Pyridone and its Representation . . . 316
Bingel, W. A.: The Symmetry Behaviour of the First-Order Density Matrix and its Natural Orbitals for Linear Molecules . . . 319
Bishop, D. M., and H. Ito: Semi-Empirical Calculations on Methyl Substituted Aromatics . . . 377
Brown, R. D., and Roby, K. R.: Approximate Molecular Orbital Theory for Inorganic Molecules. I. Analysis of Possible Integral Approximations . . . 175
— — Approximate Molecular Orbital Theory for Inorganic Molecules. II. Methods of Evaluating Basic Parameters . . . 194
— — Approximate Molecular Orbital Theory for Inorganic Molecules. III. Comparative Calculations on the Sulphate Anion . . . 278
— — Approximate Molecular Orbital Theory for Inorganic Molecules. IV. Electron Correlation in Molecular Orbital Calculations . . . 291
Bunge, C. F.: Electronic Wave Functions for Atoms. II. Some Aspects of the Convergence of the Configuration Interaction Expansion for the Ground States of the He Isoelectronic Series . . . 126

Cheesman, G. H., A. J. T. Finney, and I. K. Snook: Studies in Halogen-Halogen Bonding. I. The p-σ Model . . . 33
Chiu, M. F., and B. T. Sutcliffe: A Semi-Empirical Approach to the Estimation of ESR Isotropic Hyperfine Coupling Constants in Aromatic Radicals . . . 331
Chong, D. P., s. Thorhallssen, J., et al. . . . 51
Claxton, T. A., and D. McWilliams: The Restriction of Spin Contamination in Unrestricted Hartree Fock Wave Functions . . . 346

Das, T. P., s. Han, P. S., et al. . . . 1

Eliezer, I., and Y. K. Pan: Calculations on Some Excited States of He^- . . . 63
Evleth, E. M.: Systematics of the Electronic Absorption Spectra of Fused 5—6 Ring Heterocyclics . . . 22

Ferreira, R., and J. K. Bates: The Correspondence between the Molecular Orbital and Differential Ionization Energies Methods. I. The Hydrogen Halides . . . 111
Finney, A. J. T., s. Cheesman, G. H., et al. . . . 33
Fischer, H., and Kollmar, H.: Energy Partitioning with the CNDO Method . . . 163
Forst, W., s. Huy, L.-K. . . . 393

Han, P. S., T. P. Das, and M. F. Rettig: Hyperfine and Quadrupole Interactions at Nitrogen in Hemin . . . 1
Hansen, Aa. E.: On the Equivalence of Different Hamiltonians for the Semi-Classical Radiation Theory . . . 217
Hartmann, H., s. Helfrich, K. . . . 263
Helfrich, K., and H. Hartmann: Generalized Quantum Mechanical Two-Centre Problems. I. General Theory and Results for Some Two-Centre Coulomb Problems 263
Hirst, D. M., and M. E. Linington: Localized Orbitals for the Oxygen and Nitric Oxide Molecules . . . 55
Huy, L.-K., and W. Forst: Comparison of Omega and PPP Techniques for Reactivity Calculations in Methyl-Substituted Naphthalenes . . . 393

Pagina

Ito, H., s. Bishop, D. M. 377

Jug, K.: Determination of α and β Parameters in Approximate SCF MO Theories . . . 95

Kollmar, H., s. Fischer, H. 163
Kwiatkowski, J. S.: Electronic Absorption Spectra of 3-Hydroxypyridine and 5-Hydroxypyrimidine 243

Larcher, J. F., s. Thorhallsson, J., et al. 51
Lebrun, H., et M. Suard: Emploi d'une méthode de perturbation-variation pour l'étude de la polarisation de spin dans les radicaux libres aromatiques 43
Lehn, J. M., B. Munsch et Ph. Millie: Analyse conformationnelle théorique. IV. Etude *ab initio* SCF-LCAO-MO de la méthylène imine et de l'anion vinyle 351
Lévy, B., s. Berthier, G., et al. 316
Linington, M. E., s. Hirst, D. M. 55
Linnet, J. W., s. Amaral, A. M. S. C., et al. 249
Lohr, L. L., Jr.: Coupling Coefficients for the Octahedral Group with Orthorhombic Components 373

McGlynn, S. P., s. Watson, F. H. Jr., et al. 75
McWilliams, D., s. Claxton, T. A. 346
Meyer, A. Y.: Multi-Conformational Compounds with Two Absorbing Groups. IV. 2-Fluoroacetaldehyde and 2-Fluorocarbonyl Compounds 226
Millie, Ph., s. Lehn, J. M., et al. 351
Munsch, B., s. Lehn, J. M., et al. 351

Olympia, P. L., Jr.: Preliminary Results on the Density Matrix Structure of the First Beryllium ^1S Excited State 145

Pan, Y. K., s. Eliezer, I. 63
Paoloni, L., s. Berthier, G., et al. 316
Pearson, R. G.: Symmetry Rules for Predicting the Course of Chemical Reactions . . 107
Politzer, P.: Atom Promotion and Bond Properties in the Hydrogen and the Lithium Molecules 120

Rettig, M. F., s. Han, P. S., et al. 1
Roby, K. R., s. Brown, R. D. 175
— s. Brown, R. D. 194
— s. Brown, R. D. 278
— s. Brown, R. D. 291

Snook, I. K., s. Cheesman, G. H., et al. 33
Suard, M., s. Lebrun, H. 43
Sutcliffe, B. T., s. Chiu, M. F. 331

Thorhallsson, J., J. F. Larcher, and D. P. Chong: Application of a Force Constraint to an Approximate Wavefunction of LiH 51

Watson, F. H., Jr., A. T. Armstrong, and S. P. McGlynn: Electronic Transitions in Mono-Olefinic Hydrocarbons. I. Computational Results 75
Williamson, C. T., s. Amaral, A. M. S. C., et al. 249

Zeeck, E.: *ab inito*-Rechnungen über die Behinderung der freien Drehbarkeit der Methylgruppe in Propylen 155

Erratum

Ohno, K.: Some Remarks on the Pariser-Parr-Pople Method 247

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans le mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 16

Index

Fasc. 5

Commentationes

BINGEL, W. A.: The Symmetry Behaviour of the First-Order Density Matrix and its Natural Orbitals for Linear Molecules 319

CHIU, M. F., and B. T. SUTCLIFFE: A Semi-Empirical Approach to the Estimation of ESR Isotropic Hyperfine Coupling Constants in Aromatic Radicals 331

CLAXTON, T. A., and D. MCWILLIAMS: The Restriction of Spin Contamination in Unrestricted Hartree Fock Wave Functions 346

LEHN, J. M., B. MUNSCH et PH. MILLIE: Analyse conformationnelle théorique. IV. Etude *ab initio* SCF-LCAO-MO de la méthylène imine et de l'anion vinyle 351

Theoretical Conformational Analysis. IV. An abinitio SCF-LCAO-MO Study of Methylenimine and of Vinyl Anion

LOHR, L. L., JR.: Coupling Coefficients for the Octahedral Group with Orthorhombic Components 373

BISHOP, D. M., and H. ITO: Semi-Empirical Calculations on Methyl Substituted Aromatics 377

HUY, L.-K., and W. FORST: Comparison of Omega and PPP Techniques for Reactivity Calculations in Methyl-Substituted Naphthalenes 393

Relatio

BENDER, C. F.: Uses of Pair Energy Techniques in Molecular Calculations: The Ammonia Molecule 401

Indexed in Current Contents

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany — Copyright © by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1970